

機械学習分子動力学シミュレーションによる LSI 配線金属/絶縁体界面の熱抵抗評価

Machine Learning Molecular Dynamics to Estimate the Thermal Boundary Resistance at LSI Interconnect Metals/Insulator Interfaces

早大理工 ○久保田 翔, 西村 祐亮, 内藤 真慈, 渡邊 孝信

Waseda Univ., °S. Kubota, Y. Nishimura, M. Naito and T. Watanabe

E-mail: yukp05wg@fuji.waseda.jp

【はじめに】大規模集積回路(LSI)の配線にはCuが広く使われているが、配線の微細化に伴う電気抵抗の上昇が問題となっており^[1]、新たな配線材料としてRuに注目が寄せられている^[2]。LSIの故障には熱が関与した問題が多く^[3]、電気抵抗だけでなく熱抵抗の抑制も重要な課題である。LSIの動作中の温度上昇は配線の微細化に伴ってますます深刻となり、層間絶縁膜との界面熱抵抗を小さく抑えることが重要となる^[4]。当グループでは、配線/絶縁膜間の界面熱抵抗の支配要因に関する原子論的理解を深めるため、Ruを含む金属とSiO₂に適用可能な機械学習ポテンシャルを用意し、界面熱抵抗の計算を可能にした^[5]。今回、Ru/SiO₂界面に交差するRu結晶粒界が、Ru/SiO₂界面の熱抵抗に与える影響を調査した。

【計算方法】Behler-Parrinello Neural Network (BPNN)ポテンシャル^[6]を用いて、EHEXアルゴリズム^[7]に基づく熱交換非平衡分子動力学(MD)計算を実施した。Fig.1に使用したa-SiO₂/Ru/a-SiO₂配線モデルを示す。a-SiO₂層とRu結晶層を積層したモデルを用意し、300Kの定温MD計算で構造全体を緩和させた。結晶粒界を含むRu配線モデルは、Atomsk^[8]のVoronoi分割機能を用いて生成した。粒界がないRu単結晶層をFig.2に、10度の結晶粒界を持つRu多結晶層をFig.3に示す。Ru配線層の中央に高温熱浴、左右のSiO₂層の両端に低温熱浴を設定し、両熱浴の間で0.5eV/psペースで熱交換を行いながら200psのMD計算を行った。定常状態の温度プロファイルと熱流から系全体の熱抵抗を求め、Ru層とSiO₂の厚さを変えた異なる配線モデルの熱抵抗を直線近似したときの切片を界面熱抵抗とした。

【計算結果】配線モデルの厚さと熱抵抗の関係をFig.4に示す。結晶粒界がある方が系全体の熱抵抗が上昇するが、界面熱抵抗は、結晶粒界がないモデルで $7.84 \times 10^{-10} \text{ m}^2\text{K/W}$ 、10度の結晶粒界を持つモデルで $7.78 \times 10^{-10} \text{ m}^2\text{K/W}$ とほぼ一致した。すなわち、界面熱抵抗は配線金属の粒界サイズに依存しないことを示唆している。一方、前回の計算では界面熱抵抗は金属の種類によって顕著に変化したことから、配線材料そのものを見直すことが熱問題の解決に有効と考えられる。

【謝辞】本研究は科学研究費・基盤研究(B)(23K22800)の支援を受けて行われた。

【参考文献】 [1] J. H. Moon, et al., Adv. Sci. 2023, 10, 2207321. [2] K. Croes et al., 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), San Francisco, CA, USA, 2018, pp. 5.3.1-5.3.4 [3] M. Pedram et al., in Proceedings of the IEEE, vol. 94, no. 8, pp. 1487-1501, Aug. 2006. [4] Tianzhuo Zhan et al., ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12, 22347-22356. [5] S. Hashimoto et al., The 85th JSAP Autumn Meeting 2024 Joint Session N "Informatics" 18a-A21-9. [6] T. Morawietz et al., J Comput Aided Mol Des 35, 557-586 (2021). [7] P. Wirnsberger, et al. The Journal of Chemical Physics 143 12 (2015): 124104. [8] Pierre Hirel, Comput. Phys. Comm. 197 (2015) 212-219.



Fig.1 a-SiO₂/Ru/a-SiO₂ wiring model

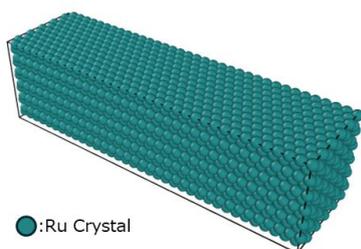


Fig.2 Ru layer without grain boundary

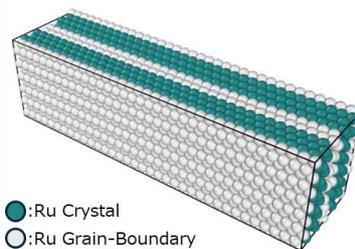


Fig.3 Ru layer with 10-degree grain boundary

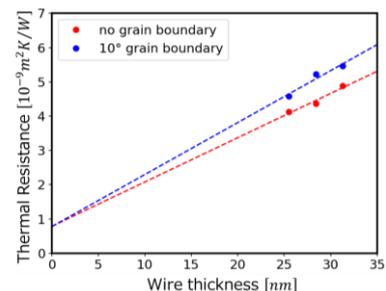


Fig.4 Relationship between wiring thickness and thermal resistance